

課題名(タイトル):

生命分子の実験的制限付き構造決定

利用者氏名: 山崎 俊夫

理研における所属研究室名:放射光科学研究センター、NMR 研究開発部門、NMR 開発グループ、次世代 NMR 装置開発チーム

- | | |
|--|--|
| <p>1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係
タンパク質の構造を求めるために NMR などからの断片的構造情報を有効利用するためのプログラム開発と、応用を継続する予定だった。化学シフトなどを量子化学的計算で求め、実験と比較することもテーマとするはずだった。</p> <p>2. 具体的な利用内容、計算方法
使わなかった。自前の PC cluster で解決可能な規模の計算にとどまった。</p> <p>3. 結果
なし</p> <p>4. まとめ
なし</p> <p>5. 今後の計画・展望
NMR 化学シフトの構造決定への利用が重要なテーマになる。計算手段の整備をしたい。
構造未知のテーマに対して、NMR で苦手になっている部分の解析を MD 計算を併用することでよい結果が得られた(自前の PC cluster)。規模を上げていきたい。</p> | <p>6. 利用がなかった場合の理由
もう少し時間の余裕があれば、試し利用からの利用が進んだと思う。</p> |
|--|--|